量子スピングラスの理論

東大理　鈴木増雄

1. 何が問題か

スピングラスに関する今までの多くの研究は、古典スピン系、特にイジング模型におけるフラストレーションの効果に基づく現象が中心であった。ここで問題にしたいのは、フラストレーション、量子効果および熱的ゆらぎとの絡み合いである。低温になるほど量子効果は効いてくるから、低次元ほどこの効果は重要となる。特に、1次元、2次元においては有限温度ではスピングラスにはならないので、温度 $T=0$ の近傍でのスケーリング則が重要な研究課題となる。勿論、量子効果によって相図がどう変化するかを3次元で調べることも重要である[1-9]。

2. どんなモデルを研究するか

まず、イジングスピングラスに量子トンネル効果をとり入れたトランスバース・イジング・スピングラスを研究することが興味深い[1-9]。そのモデルは

$$\mathcal{H} = -\sum_{<i,j>} J_{ij} S_j^z S_j^z - \Gamma \sum_{j=1}^{N} S_j^x \tag{2.1}$$

で与えられる。J_{ij}はランダム変数であり、多くの場合、$J_{ij}=\pm J$と簡単化したランダムな相互作用を取り扱う。

3. どんな方法で研究するか

a) 厳密対角化法

量子的なハミルトニアン$\mathcal{H}$を厳密に対角化するのが一つの方法である。1次元XYモデル等は対角化法によって研究できる[10]。2次元以上では有限系しか一般には対角化できない。有限系を系統的に調べ、有限サイズ・スケーリング理論を用いることも一つの方法である。

b) 量子モンテカルロ法

d-次元量子系を$(d+1)$次元古典系にマップ(ST変換)して[11]、それにモンテカルロ法を適用する方法もよく用いられている[12-17]。ただし、フラストレーションがあると「負符合問題」が現れるのでやっかいである[14,16]。

c) 量子有効場理論

著者によって提案された量子有効場理論[18,19]によって、非対角的有効場をクラスターの境界にかけ、量子効果を有効にとり込むこともできる。

4. 新しいタイプの指数積公式とその量子系への応用

前節の b) に述べた量子モンテカルロ法では、非可換な演算子 A, Bに対して成り立つ次のトロッター公式

$$e^{x(A+B)} = \lim_{n\to\infty}(e^{\frac{x}{n}A}e^{\frac{x}{n}B})^n \tag{4.1}$$

が基礎になっている。

ところで最近、もっと精度の高い高次分解公式が発見されている[21-26]。それは、次のタイプで現される:

$$e^{x(A+B)} = e^{t_1A}e^{t_2B}e^{t_3A}e^{t_4B}\cdots e^{t_MB} + O(x^{s+1}). \tag{4.2}$$

どんな高い次数 s の近似式でも、充分 Mを大きくすれば、必ず構成できることがわかっている[21-26]。しかし、3 次以上では、t_jの中の少なくとも一つは負になることが証明されている[22]。そのため、この高次分解は、新たな問題を生んでいる。

これを解消する一つの方法として、著者が最近発見したハイブリットスキームを最後に紹介したい[27]。そのアイデアは、(4.2) の形に限定せず、A と Bの交換子を一部許すことである。全部とり入れれば、よく知られた Zassenhaus 公式になる。ここでは、計算し易い交換子を許した積公式を作り、A と Bの係数等には負のパラメータが現れないようにすることである。この新しいスキームは極めて実用的であると思われる。

ここでは、具体的な例を 2,3 あげるだけにしておきたい。

<u>Type A</u>：まず A と Bの他に交換子 $[A, B]$ だけを許す場合を考える。このようなタイプの 4 次公式としては、

$$Q_4(x) = e^{-x^2C}e^{-\frac{x}{2}A}e^{-x^2C}e^{-xB}e^{x^2C}e^{-\frac{x}{2}A}e^{x^2C} \tag{4.3}$$

が見つかっている[27]。ただし、$C = \frac{1}{24}[A, B]$ である。これは量子力学に使うのには便利であるが、統計力学には不便である。それは、A, Bがエルミートでも、Cは反エルミートになるからである。

<u>Type B</u>：今、2 つの 2 次対称近似公式

$$S_a(x) = e^{-\frac{x}{2}A}e^{-xB}e^{-\frac{x}{2}A} \quad \text{および} \quad S_b(x) = e^{-\frac{x}{2}B}e^{-xA}e^{-\frac{x}{2}B}. \tag{4.4}$$

を定義しておくと、次のようにして新しいタイプの 4 次公式を作ることができる:

$$S_4(x) = Q(x)S_a(\frac{x}{3})S_b(\frac{x}{3})S_a(\frac{x}{3})Q(x) \tag{4.5}$$

および

$$S_4'(x) = S_a(\frac{x}{3})Q(x)S_b(\frac{x}{3})Q(x)S_a(\frac{x}{3}). \tag{4.6}$$

ただし、$Q(x)$ は

$$Q(x) = \exp(-\frac{1}{2}(\frac{x}{6})^3[B,[A,B]]) \tag{4.7}$$

によって与えられる。この4次分解では、A と Bが正値エルミート演算子ならば、それらが非有界であっても、$S_4(x)$ および $S_4'(x)$ は contraction operator となる。すなわち、$\| S_4(x) \| \leq 1$ および $\| S_4'(x) \| \leq 1$ である。

Type B は、電子系に応用するときに特に便利である。すなわち、

$$A = -\frac{1}{2}\Delta \quad \text{および} \quad B = V(\boldsymbol{r}) \tag{4.8}$$

のとき、よく知られた公式

$$[B,[A,B]] = | \nabla V(\boldsymbol{r}) |^2 \geq 0, \tag{4.9}$$

を用いると、交換子 $[B[A,B]]$, すなわち、$Q(x)$ を (4.5) と (4.6) に追加しても計算上では、A, Bだけの場合と本質的に変わらない。

References

1) A.J. Bray and M.A. Moor, J. Phys. C **13**, L655 ('80).

2) H. Ishii and T. Yamamoto, J. Phys. C **18**, 6225 ('85).

3) Y.V. Fedorov and E. F. Shender, Pis'ma Zh. Eksp. Theor. Fis. (Theor) **43**, 526 ('86).

4) K.D. Usadel and B. Schmitz, Solid State Commun. **64**, 975 ('87).

5) A. Crisanti and H. Rieger, J. Stat. Phys. **77**, 1087 ('94).

6) H. Rieger and A.P. Young, Phys. Rev. Lett. **72**, 4141 ('94).

7) M. Guo, R.N. Bhatt and D. Huse, Phys. Rev. Lett. **72**, 4137 ('94).

8) M. Suzuki's group, H. Asakawa, K. Kato, N. Kawashima and M. Suzuki.

9) H. Asakawa and M. Suzuki, 次の講演要項参照。

10) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56**, 1454 ('76).

11) M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, Prog. Theor. Phys. **58**, 1377 ('77). See also M. Suzuki, J. Stat. Phys. **43**, 883 ('86).

12) H. De Raedt and A. Lagendijk, Phys. Rep. **127**, 233 ('85).

13) M. Suzuki, ed., Quantum Monte Carlo Methods, Solid State Sciences, vol.74 (Springer, Berlin, 1986).

14) M. Suzuki, Physica A **194**, 432 ('93).

15) M. Suzuki, ed., Quantum Monte Carlo Methods in Condensed Matter Physics (World Scientific, Singapore, 1993).

16) M.H. Kalos, ed., Monte Carlo Methods in Quantum Problems (Reidel, Boston, 1982).

17) M. Suzuki, Physica B **206** & **207**, 180 ('95).

18) M. Suzuki, Trends in Stat. Phys. **1**, 225 ('94).

19) H. Asakawa and M. Suzuki, Physica B ('95) in press.

20) M. Suzuki, Phys. Lett. **A146**, 319 ('90) ; ibid **A165**, 387 ('92)

21) M. Suzuki, J. Math. Phys. **32**, 400 ('91).

22) M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 3015 ('92).

23) M. Suzuki, in *Fractals and Disorder,* edited by A. Bunde (North-Holland, 1992), i.e., Physica **A191**, 501 ('92).

24) M. Suzuki, Proc. Japan Acad. **69**, Ser.B, 161 ('93).

25) M. Suzuki, Physica **A205**, 65 ('94), and references cited therein.

26) M. Suzuki, Phys. Lett. A ('95) in press.